

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В ДИОКСИДЕ ХРОМА

Кашин И.В.^{1*}, Соловьев И.В.²

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ National Institute for Materials Science, Tsukuba, Japan

*E-mail: kashin.i.v@yandex.ru

THEORETICAL INVESTIGATION OF MAGNETIC INTERACTIONS IN CHROMIUM DIOXIDE

Kashin I.V.^{1*}, Solovyev I.V.²

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ National Institute for Materials Science, Tsukuba, Japan

We investigate behavior of the interatomic magnetic interactions in CrO₂, starting from original and static variant of DMFT, based on the exact diagonalization of the effective Anderson impurity Hamiltonian, and Hartree-Fock approach. The contributions of double exchange, superexchange and higher order interactions, obtained from $1/\Delta$ expansion (Δ being the intraatomic exchange splitting), were found to play an important role in stabilizing the ferromagnetic phase in CrO₂.

Цель данной работы заключается в реалистичном моделировании магнитных взаимодействий в полуметаллическом ферромагнетике CrO₂. Для исследования влияния динамических кулоновских корреляций на формирование межатомных магнитных взаимодействий были объединены первопринципные расчеты с моделированием на основе теории динамического среднего поля (DMFT) [1], уравнения которой были решены при помощи метода точной диагонализации матрицы гамильтониана примесной модели Андерсона. Этот метод был модернизирован так, что матрица генерируется на каждой стадии итеративного процесса, а не хранится в памяти вычислительного комплекса, существенно сокращая потребляемые ресурсы (на 87% [2]).

Межатомные магнитные взаимодействия были посчитаны с использованием метода бесконечно малого спинового поворота [3], основываясь на результатах расчетов в приближении Хартри-Фока, DMFT в общем случае и в статическом пределе при $\omega \rightarrow \infty$. Было показано, что стабильность ферромагнитного основного состояния CrO₂ обуславливается не только механизмом двойного обмена, но и взаимодействиями более высоких порядков, которые для полуметаллических ферромагнетиков могут быть получены из разложения по $1/\Delta$, где Δ - внутриатомное обменное расщепление [4]. При этом все значения были получены на уровне вкладов отдельных орбиталей, что позволяет проводить более глубокий анализ природы магнетизма в данном соединении. Различие между полученными на основе DMFT и приближения Хартри-Фока значениями обменного взаи-

модействия свидетельствует о важности учета динамических кулоновских корреляций для исследования стабильности ферромагнитного основного состояния CrO_2 . А высокая детализация полученных результатов послужит надежной теоретической базой для верной интерпретации новейших экспериментальных данных.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ №14-12-00306.

1. Georges A., Kotliar G. et al., Rev. Mod. Phys., 68, No. 1 (1996).
2. Кашин И.В., Решение квантовых моделей методом точной диагонализации (2011).
3. Katsnelson M. I., Lichtenstein A. I., Phys. Rev. B, 61, 8906 (2000).
4. Solovyev I. V., Terakura K., Phys. Rev. Lett., 82, 2959 (1999).

МИКРОМАГНИТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКИХ ЦЕПОЧЕК ПЕРЕХОДНЫХ СТРУКТУР В ВИХРЕВЫХ ДОМЕННЫХ СТЕНКАХ (ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ В СРЕДЕ MUMAX 3)

Байкенов Е.Ж.¹, Изможеров И.М.^{1*}, Зверев В.В.¹, Филиппов Б.Н.^{1,2}

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ ФГБУН «Институт физики металлов УрО РАН», г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: ivan_izm@inbox.ru

MICROMAGNETIC SIMULATIONS OF PERIODIC CHAINS OF TRANSITION STRUCTURES IN VORTEX-LIKE DOMAIN WALLS (PARALLEL PROCESSING IN MUMAX 3)

Baykenov E.G.¹, Izmozherov I.M.^{1*}, Zverev V.V.¹, Fillipov B.N.²

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Institute of Metal Physics, Ural Branch of RAS, Ekaterinburg, Russia

Many properties of magnetically ordered materials depend on existence and dynamical behavior of locally inhomogeneous transition structures (TS's) in domain walls (DW's). This work deals with TS's, which emerge in asymmetric Bloch domain walls and their chains' interaction. We achieve energies of domain walls as functions of the distance between two TS's in presence and absence of external field in order to determine the kind of interaction: repulsion, attraction or fixing on definite distance. We have adapted the OOMMF programs for the parallel processing package MuMAX 3.

Многие свойства материалов с магнитным упорядочением, важные с практической точки зрения (магнитные потери, гистерезис и др.) определяются наличием локально неоднородных структур и их динамическим поведением. Обычное перемагничивание магнетика представляет собой процесс видоизменения формы доменов, сопровождающегося движением доменных стенок (ДС).